

Introdução

A ideia geral no estudo de teoria espectral dos grafos é que conseguimos associar qualquer grafo a uma matriz correspondente que possui informações sobre a sua estrutura.

Uma questão surge acerca dessa associação:

De que forma os autovalores da matriz se relacionam à estrutura do grafo?

Motivados por essa questão, escolhemos a Laplaciana normalizada \mathcal{L} como representação matricial de um grafo G e veremos como alguns parâmetros espectrais - energia e índice geral de Randić - se relacionam.

Por fim, vemos dois resultados acerca do espectro de \mathcal{L} .

Teoria dos Grafos

Um **grafo**, denotado por G , é um par (V, A) , onde os elementos de V são chamados de **vértices** e os elementos de A de **arestas**, sendo cada aresta representada por um par de vértices.

Abaixo, temos $V = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ e $A = \{12, 15, 23, 24, 25, 36, 45, 56\}$:

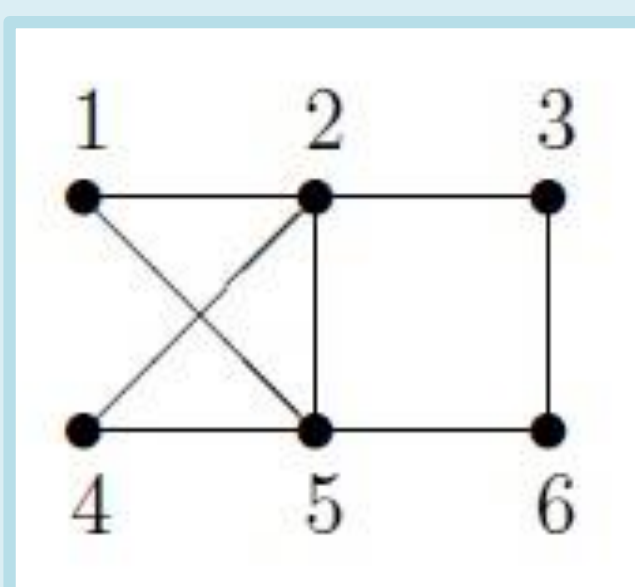


Figura 1: Grafo com 6 vértices e 8 arestas.

O **grau** de um vértice x , denotado por d_x , é o número de arestas incidentes a ele. Na figura acima, $d_1 = 2, d_2 = 4$ etc.

O **volume** de G , denotado por $vol(G)$, é a soma dos graus de todos os vértices de G .

Uma **matriz de graus**, denotada por D , é aquela cuja diagonal principal $D(x, x) = d_x$ e $D(x, y) = 0$, caso $x \neq y$.

O **traço** de uma matriz M , denotado por $tr(M)$, é a soma dos elementos da sua diagonal principal.

Laplaciana Normalizada (\mathcal{L})

A Laplaciana normalizada é apenas uma das formas matriciais de representar um grafo. Suas linhas e colunas são indexadas pelos vértices de $G = (V, A)$ e é definida por:

$$L(x, y) = \begin{cases} 1, & \text{se } x = y \text{ e } d_x \neq 0, \\ -\frac{1}{\sqrt{d_x d_y}}, & \text{se } xy \in A, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Abaixo podemos ver a matriz \mathcal{L} do grafo G da Figura 1:

$$\mathcal{L} = \begin{bmatrix} 1 & -\frac{1}{\sqrt{8}} & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{8}} & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{8}} & 1 & -\frac{1}{\sqrt{8}} & -\frac{1}{\sqrt{8}} & -\frac{1}{4} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{8}} & 1 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{8}} & 0 & 1 & -\frac{1}{\sqrt{8}} & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{8}} & -\frac{1}{4} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{8}} & 1 & -\frac{1}{\sqrt{8}} \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{8}} & 1 \end{bmatrix}$$

Espectro e Energia de \mathcal{L}

O **espectro** de uma matriz M é o conjunto dos seus autovalores, i.e., os λ tais que $\det(\lambda I - M) = 0$, onde I é a matriz identidade.

Denotaremos por $\lambda_1(\mathcal{L}) \leq \lambda_2(\mathcal{L}) \leq \dots \leq \lambda_n(\mathcal{L})$ os n autovalores de \mathcal{L} .

Se G é um grafo de ordem n e \mathcal{L} é a Laplaciana normalizada associado a G , então a **\mathcal{L} -energia de G** é definida por

$$E_{\mathcal{L}}(G) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i(\mathcal{L}) - 1|$$

Índice Geral de Randić

Seja G um grafo de ordem n (possui n vértices), sem vértices isolados ($d_x \neq 0, \forall x \in V$). O **índice geral de Randić**, denotado por $R_{\alpha}(G)$, é definido como

$$R_{\alpha}(G) = \sum_{x \sim y} (d_x d_y)^{\alpha}$$

onde a soma é sobre todas as arestas $xy \in A$. Utilizaremos neste trabalho $\alpha = -1$.

Relação entre $R_{-1}(G)$ e \mathcal{L}

Seja G um grafo de ordem n sem vértices isolados. Então

$$2R_{-1}(G) \leq E_{\mathcal{L}}(G) \leq \sqrt{2nR_{-1}(G)}.$$

Acima vemos a importância em conhecer $R_{-1}(G)$ quando queremos informações sobre a \mathcal{L} -energia de G , pois ao determinarmos como a estrutura de G se relaciona com $R_{-1}(G)$, saberemos informações sobre $E_{\mathcal{L}}(G)$.

Alguns resultados sobre \mathcal{L}

Teorema da Matriz – Árvore

Seja G um grafo de ordem n com matriz de graus D . Então o número de árvores geradoras de G é dado por

$$t(G) = \frac{\det(D)}{vol(G)} \prod_{i=2}^n \lambda_i(\mathcal{L})$$

onde \mathcal{L} é a Laplaciana normalizada de G .

A seguir, temos um resultado relacionando o número de árvores geradoras e os coeficientes do polinômio característico de \mathcal{L} . Mas primeiro, alguns novos conceitos.

Sejam $G = (V, A)$ um grafo de ordem n e $J = \{j_1, \dots, j_q\} \subseteq V$. Para $J \neq \emptyset$, definimos G_J como sendo o multigrafo obtido de G ao trocar os vértices $\{j_1, \dots, j_q\}$ por um único vértice v . O número de arestas de v nele mesmo é igual ao número de arestas entre os vértices de J , e o número de arestas de v à $k \in (V \setminus J)$ é igual ao número de $j \in J$ tais que $jk \in A$.

Corolário

Seja G um grafo sem vértices isolados. Se \mathcal{L} possui polinômio característico

$$\det(\lambda I - \mathcal{L}) = c_0 \lambda^n + c_1 \lambda^{n-1} + \dots + c_{n-1} \lambda^1 + c_n$$

então para $i = 0, 1, \dots, n$

$$c_{n-i} = (-1)^{n-i} \sum_{\substack{J \subseteq V \\ |J|=i}} \frac{t(G_J)}{\prod_{k \in V \setminus J} d_k}$$

onde $t(G_{\emptyset}) = 0$ e $\prod_{k \in \emptyset} d_k = 1$.

Referências

- CAVERS, M.S.; (2010). *The Normalized Laplacian Matrix and General Randić Index of Graphs*.
BIGGS, N.; (1993). *Algebraic Graph Theory*, 2ª ed., Cambridge University Press, Cambridge.
BIGGS, N.; LLOYD, E.; WILSON, R.; (1986). *Graph Theory*, Oxford University Press.
CVETKOVIC, D.; DOOB, M.; SACHS, H.; (1980). *Spectra of Graphs*, Academic Press, New York.